

Oefentoets Fysische Chemie II, Dynamica en Interactie
16 November 2009, 9.00-10.45 (constanten zie ommezijde)

1) De kinetische energie van een deeltje met massa m en impuls $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ is $\mathbf{p} \cdot \mathbf{p} / 2m$.

De quantum mechanische operator voor de impuls is $\mathbf{p} = \hbar/i (\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z)$.

De Schrödinger vergelijking voor een deeltje met massa m in een doos met lengte (L_x, L_y, L_z) is:

$(\mathbf{p} \cdot \mathbf{p} / 2m) \psi = E \psi$. Het deeltje kan zich vrij bewegen in deze doos.

Leid expliciet af wat de eigenfuncties ψ en de eigenwaarden E zijn, en gebruik daarbij de randvoorwaarden.

2) Wat is de energie van straling die resonant is met het energieverschil tussen de niveaus $n=3$ en $n=4$ van een electron in een kubische doos van lengte $L=1.50$ nm? Bereken de energie in cm^{-1} .

3) Wat is de de Broglie golflengte van een N_2 molecuul bij $T=400$ Kelvin?

Stel het N_2 molecuul bevindt zich in een volume van 1.00 m³ met $T=400$ Kelvin. Gedraagt het zich als een quantum mechanisch deeltje of een klassiek deeltje in dit volume? Leg duidelijk uit waarom.

4) Beschrijf een experiment waaruit duidelijk blijkt dat atomen zich gedragen als golven. Wat is de quantum mechanische golflengte λ als de deeltjes een massa m en snelheid v hebben?

5) Stel we willen een Rb atoom (massa $m=85$ u) vanaf kamertemperatuur ($T=298$ K) afremmen met een laser totdat het atoom ongeveer stil staat: $v \sim 0$ m/s. We doen dat met een laser met een golflengte van $\lambda=789$ nm. De kinetische energie van een deeltje met snelheid v is, $E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} m v^2$.

Het Rb-atoom absorbeert steeds uit dezelfde richting de fotonen uit een laser straal, en fluoresceert in alle richtingen.

Hoeveel fotonen moet het Rb-atoom ongeveer absorberen om door de laser afgeremd te worden en uiteindelijk ongeveer stil te komen staan?

6) Bereken de verwachtingswaarde van \mathbf{p} en \mathbf{p}^2 voor een deeltje met massa m in een 1-dimensionale doos met lengte L . De verwachtingswaarde van een grootte in een 1-dimensionale ruimte, g , is:

$$\langle g \rangle = \int \psi^*(x) g_x \psi(x) dx$$

7)

a) Wat is een 1-dimensionale harmonische potentiaal? Wat is de kracht op een deeltje met massa m dat zich bevindt op een positie, x , in zo'n 1-dimensionale harmonische potentiaal?

b) Hoe ziet de 1-dimensionale Schrödinger vergelijking eruit voor een deeltje met massa m dat zich beweegt in een harmonische potentiaal? Wat zijn de energie eigenwaarden van deze vergelijking?

c) Stel we hebben een diatoom bestaande uit een deeltje A met massa m_A en deeltje B met massa m_B . De effectieve massa die beweegt in de harmonische krachtpotentiaal van de binding A-B is $m_{eff} = m_A m_B / (m_A + m_B)$.

Wat is de krachtskonstante k van het diatoom $H^{35}Cl$ als de harmonische eigenfrequentie gelijk is aan $\nu = 2990 \text{ cm}^{-1}$.

8) Stel we hebben een quantum deeltje dat zich beweegt in een cirkel. De eigenfuncties behorende bij deze beweging zijn:

$$\psi_m(\varphi) = (1/2\pi)^{1/2} e^{-im\varphi}, \text{ met } m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \text{ and } 0 \leq \varphi \leq 2\pi.$$

Wat is $\langle \varphi \rangle$?

9) Stel we hebben een gepulsde laser die licht pulsen uitzendt die ongeveer 5 ns duren. De golflengte van de straling is 1064 nm. Het aantal laser pulsen per seconde is 10, en het gemiddelde vermogen is 10 Watt. Hoeveel fotonen zitten er in elke laser puls?

Constantes:

$$h = 6.6262 \cdot 10^{-34} \text{ Js}, \quad c = 2.9979 \cdot 10^8 \text{ m/s}, \quad e = 1.6022 \cdot 10^{-19} \text{ C}, \quad k = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$$

$$m_e = 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}, \quad \text{atomaire massa eenheid } u = 1.66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$